



Predicción de las estructuras supramoleculares en la interfase de OPVs: moléculas orgánicas pequeñas con PCBM

Nancy Cihuapilli Barrueta Flores* y Carlos Amador Bedolla*.

*Facultad de Química, UNAM, México CD. MX.

e-mail: nan_tzn_111@hotmail.com

El proceso de transferencia de carga, es clave para la conversión de estados excitados en iones, en los sistemas fotovoltaicos orgánicos (OPV). A diferencia de sus homólogos inorgánicos convencionales, en esta clase de sistemas fotovoltaicos el proceso de transferencia es complejo al incluir obligatoriamente sistemas orgánicos π -conjugados en la capa activa de la OPV¹.

Una propiedad de gran importancia para que se lleve a cabo la transferencia de carga, es el arreglo estructural que adoptan este tipo de moléculas, en donde es necesario conocer con gran precisión la estructura tanto del estado basal como del estado excitado –del donador y del aceptor– para predecir la formación del excitón, la separación del agujero y el electrón y por tanto, la transferencia de carga.

Los cálculos basados en la teoría de funcionales de la densidad (DFT) han mostrado gran precisión en la predicción de la estructura geométrica de las moléculas. Como primer paso en el estudio del arreglo estructural que adoptan sistemas moleculares amorfos, –de los que se emplean en las OPVs y de cuya estructura depende la transferencia de carga–, este trabajo presenta una serie de cálculos teóricos con los que se evalúan funcionales de la densidad² en el estudio de estructuras moleculares, del donador –molécula π -conjugada–, la del aceptor –PCBM³ (éster metílico del ácido fenil-C61 butírico)– y de las moléculas juntas –donador y aceptor–, para estudiar la modificación estructural que se tiene de la interacción entre ambas.

Referencias:

¹Brédas, J.-L.; Beljonne, D.; Coropceanu, V.; Cornil, J. *Chem. Rev.* **2004**, 11, 4971.

²Brémond, E.; Savarese, M.; Qiang Su, N.; Pérez-Jiménez, A.; Xu, X.; Sancho-García, J.; Adamo, C. *J. Chem. Theory Comput.* **2016**, 2, 459.

³Van den Brande N.; Van Lier, G.; Da Pieve, F.; Van Assche, G.; Van Mele, B.; De Proft, F.; Geerlings, P. *RSC Adv.* **2014**, 95, 52658.